

3.) Nichtrelativistische Grenzfall

- Kopplung von Atomen an inhomogenes Feld,
um Spektroskopie zu verstehen, dabei Dirac-
gleichung ablesen, weil wesentliche Eigenschaften
bereits in Störungstheorie f. relativistische Effekte
verstanden werden können

≙ Ableitung v. Termen wie Spin-Bahn WW
aus der Diracgleichung

Einführung des Felds durch Potentiale ϕ, \vec{A}

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q \vec{A}, \quad H \rightarrow H + q \phi$$

analog Mechanik.

Diracgleichung eines Elektrons im Potentiale ϕ, \vec{A}

$$i \hbar \partial_t \vec{\psi} = \left(c \hat{\alpha} \cdot (\vec{p} - q \vec{A}) + \hat{\beta} m c^2 + q \phi \right) \vec{\psi}$$

$\hat{\alpha}^i$ Vektor v. Matrizen

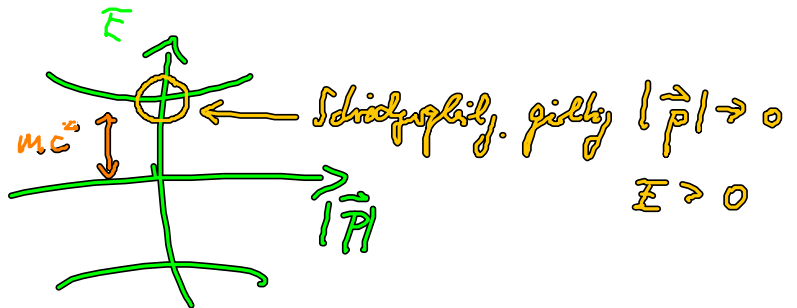
\vec{A}, ϕ : als angelegte Felder v. außen
 bzw. abgestrahlte Felder d. Elektronen

Sinnvolle Definition $\vec{p} - q \vec{A} = \vec{\pi}$

3.1. Näherungsprozess

Herleitung einer verbesserten Schrödingergleichung aus Diracgleichung

Zweiye d. E-Dispersion



$$\vec{\psi} = (\vec{\psi}_1, \vec{\psi}_2)$$

$\vec{\psi}_1$ "Teilchenartig"
 $\vec{\psi}_2$ "Antiteilchenartig"

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \vec{\psi}_1 \\ \vec{\psi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & \varphi_2 \\ \varphi_1 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \end{pmatrix} + g\phi \begin{pmatrix} \vec{\psi}_1 \\ \vec{\psi}_2 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \vec{\psi}_1 \\ -\vec{\psi}_2 \end{pmatrix}$$

Idee: um die Dynamik in \bigcirc zu verstehen, Ansatz:

$$\begin{pmatrix} \vec{\psi}_1 \\ \vec{\psi}_2 \end{pmatrix} = e^{-i \frac{mc^2}{\hbar} t} \begin{pmatrix} \vec{\tilde{\psi}}_1 \\ \vec{\tilde{\psi}}_2 \end{pmatrix}$$

↑ sind zu bestimmen

Forderung: $\partial_t \vec{\tilde{\psi}}_i \ll \frac{mc^2}{\hbar} \vec{\tilde{\psi}}_i$

einsetzen:

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \vec{\tilde{\psi}}_1 \\ \vec{\tilde{\psi}}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & \varphi_2 \\ \varphi_1 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \end{pmatrix} + g\phi \begin{pmatrix} \vec{\tilde{\psi}}_1 \\ \vec{\tilde{\psi}}_2 \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} \vec{\tilde{\psi}}_1 \\ \vec{\tilde{\psi}}_2 \end{pmatrix}$$

↑ Teilchen

↑ Abbildung

$$\vec{\tilde{\psi}} \rightarrow \varphi$$

Komponentenweise:

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi}_1 = c \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi} \vec{\psi}_2 + q\phi \vec{\psi}_1$$

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi}_2 = c \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi} \vec{\psi}_1 + q\phi \vec{\psi}_2 - 2mc^2 \vec{\psi}_2$$

① sehr groß im Vgl. zu
 ② soll kleineren Log. entsprechen

3.2. Pauligleichung ohne Spin-Bohr-Kopplg.

einfachste Näherung: $q\phi \vec{\psi}_2, \dot{\vec{\psi}}_2 \ll mc^2 \vec{\psi}_2$

$$\vec{\psi}_2 = \frac{\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \vec{\psi}_1 \quad \text{Teilchengleichung}$$

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi}_1 = \frac{(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \vec{\psi}_1 + q\phi \vec{\psi}_1$$

sieht ähnlich aus wie Schrödinger bzw. Pauligleichung,

aber $(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi})^2$ muß explizit berechnet werden

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \bar{u}_1 + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \bar{u}_2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \bar{u}_3$$

\uparrow
 $\vec{p}_x - q \vec{A}_x$

$$= \begin{pmatrix} \bar{u}_3 & \bar{u}_1 - i\bar{u}_2 \\ \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 & -\bar{u}_3 \end{pmatrix}$$

$$\left(\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{u}}{\hbar} \right)^2 = \begin{pmatrix} \bar{u}_3 & \bar{u}_1 - i\bar{u}_2 \\ \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 & -\bar{u}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_3 & \bar{u}_1 - i\bar{u}_2 \\ \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 & -\bar{u}_3 \end{pmatrix}$$

Reihenfolge der Operatoren beachten,

wirkt auch am Ende auf $\vec{\psi}_x(\vec{r}, t)$

\uparrow

$$= \begin{pmatrix} \phantom{\bar{u}_3} & \phantom{\bar{u}_1 - i\bar{u}_2} \\ \phantom{\bar{u}_1 + i\bar{u}_2} & \phantom{-\bar{u}_3} \end{pmatrix}$$

$$\text{Einyl 1-2 : } \underline{\underline{\bar{u}_3}} (\underline{\underline{\bar{u}_1 - i\bar{u}_2}}) + (\underline{\underline{\bar{u}_1 - i\bar{u}_2}}) (\underline{\underline{-\bar{u}_3}}) = a_{\alpha}$$

$$= \begin{pmatrix} \bar{u}_3^2 + \bar{u}_1^2 + \bar{u}_2^2 + i(\bar{u}_1\bar{u}_2 - \bar{u}_2\bar{u}_1) & (\bar{u}_3\bar{u}_1 - \bar{u}_1\bar{u}_3) - i(\bar{u}_3\bar{u}_2 - \bar{u}_2\bar{u}_3) \\ (\bar{u}_1\bar{u}_3 - \bar{u}_3\bar{u}_1) + i(\bar{u}_2\bar{u}_3 - \bar{u}_3\bar{u}_2) & (\bar{u}_1^2 + \bar{u}_2^2 + \bar{u}_3^2) - i(\bar{u}_1\bar{u}_2 - \bar{u}_2\bar{u}_1) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{\pi}^z & 0 \\ 0 & \hat{\pi}^z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & [\bar{u}_3, \bar{u}_1] \\ [\bar{u}_3, \bar{u}_1] & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -[\bar{u}_3, \bar{u}_2] \\ [\bar{u}_3, \bar{u}_2] & 0 \end{pmatrix}$$

$\sim \hat{\sigma}_y$ $\sim \hat{\sigma}_x$

$$+ i \begin{pmatrix} [\bar{u}_1, \bar{u}_2] & 0 \\ 0 & -[\bar{u}_1, \bar{u}_2] \end{pmatrix}$$

$\sim \hat{\sigma}_z$

$$= \begin{pmatrix} \hat{\pi}^z & 0 \\ 0 & \hat{\pi}^z \end{pmatrix} + \underbrace{i\hat{\sigma}_y [\bar{u}_3, \bar{u}_1] - i\hat{\sigma}_x [\bar{u}_3, \bar{u}_2] + i\hat{\sigma}_z [\bar{u}_1, \bar{u}_2]}$$

$$(\vec{\pi})^2 = (\vec{p} - q\vec{A})^2$$

$$\begin{vmatrix} \hat{\sigma}_x & \hat{\sigma}_y & \hat{\sigma}_z \\ \pi_x & \pi_x & \pi_x \\ \pi_y & \pi_y & \pi_y \end{vmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i(\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \cdot \vec{\sigma}$$

in Schröd. f. $\vec{\psi}_1$ einsetzen:

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi}_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\pi}^2 \vec{\psi}_1 + i \underbrace{\vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi} \times \vec{\pi})}_{\text{relativistisch Korrektur}} \vec{\psi}_1 + q\phi \vec{\psi}_1$$

Schrödingergleichung

$$[\vec{\pi} \times \vec{\pi}]^i = [(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})]^i$$

gemischte Terme \vec{p}, \vec{A} fallen bei äußere Kreuzprodukte verschwinden

$$= [-q\vec{A} \times \vec{p} - q\vec{p} \times \vec{A}]^i$$

$$= -q \frac{\hbar}{i} \left(\epsilon^{ijk} A_j \partial_k + \epsilon^{ikj} \partial_k A_j \right)$$

j, k wird summiert

$$= -q \frac{\hbar}{i} \epsilon^{ijk} \left(A_j \partial_k - \partial_k A_j \right)$$

$$= -q \frac{\hbar}{i} \epsilon^{ijk} \left(-\partial_k A_j \right)$$

$$= -q \frac{\hbar}{i} \underbrace{\epsilon^{ikj} \partial_k A_j}_{[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_i} = -q \frac{\hbar}{i} B^i$$

$$[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_i$$

damit ergibt sich die Pauli-Gleichung: $i\hbar \dot{\vec{\psi}}_{\pm} = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right] \vec{\psi}_{\pm}$

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi}_{\pm} = \left(\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right) \vec{\psi}_{\pm}$$

$$\begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$$

$$- \frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \vec{\psi}_{\pm}$$

$\frac{g}{2m} \rightarrow$ Bahndipolmoment

it $\dot{\vec{\psi}} = \hat{H}_{\text{Pauli}} \vec{\psi}$ in Vektorform

Bsp f. Erwartung Zeeman-Effekt in stark Magnetfeld,

die in H-Bauform \Rightarrow Spin-Bahn-Kopplung
Darwin-Term
Dipolkorrektur

 nicht VL

$\vec{\psi}_1 = \psi_{\text{eluc}} (\hat{r}) \vec{\chi}_{m_s}$
↑ ↓ ↓
Austausch H-Atom.fkt. Spin.fkt.

$\vec{\chi}_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ A

$$H = \underbrace{\left(\frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)}_{H\text{-Atom in Kernpotential } \phi} + \frac{e}{2m_0} \left(l_z \frac{1}{\hbar} + 2 \frac{1}{\hbar} s_z \right) B_z$$

↑
↑
 Drehimpuls
 am OH1
 (aus l_p Term
 in $(\vec{p}-\vec{A})^2$)

↑
 $\frac{1}{\hbar} s_z$
 Spinoperator

$$\vec{\Psi}_n = \Psi_{nlm} \vec{\chi}_{ms}$$

$$H \Psi_{nlm} \vec{\chi}_{ms} = \left(\underbrace{\epsilon_n}_{H\text{-Atom Energie}} + \frac{B_z e}{2m} \left(\frac{1}{\hbar} m_l + 2 \frac{1}{\hbar} m_s \right) \right) \Psi_{nlm} \vec{\chi}_{ms}$$

↑
↑
 H-Atom
 Energie

↑
 $\frac{1}{\hbar} g$ gyromagnetisches
 Faktor

Energie d. H-Atoms im Magnetfeld

